Engenharia Química

DESENVOLVIMENTO DE FERRAMENTAS COMPUTACIONAIS PARA PROJETO DE REATORES QUÍMICOS

RAFAEL SILVA BARBOSA - 10° módulo de Engenharia Química, UFLA, bolsista PIBIC/CNPq;

Natália Maira Braga Oliveira - Professora do Departamento de Engenharia, Setor de Engenharia Química, UFLA. Orientadora; - Orientador(a)

Nathan Sombra Evangelista - Professor do Departamento de Engenharia, Setor de Engenharia Química, UFLA. Coorientador.

Resumo

Recursos computacionais que assistem a simulação e o desenvolvimento de projetos vêm se mostrando cada vez mais importantes para a indústria e otimização de processos. O objetivo deste trabalho foi desenvolver um acervo de códigos gratuitos, na linguagem de programação Python, para cálculos relativos ao projeto de reatores químicos, visando auxiliar na formação e na atuação profissional de engenheiros químicos, sendo implementado na web para facilitar o acesso e a utilização por parte dos usuários. Para o desenvolvimento dos códigos, foram utilizados exemplos contidos no livro “Elementos de Engenharia das Reações Químicas” de H. Scott Fogler, uma bibliografia clássica relativa a projeto de reatores. Sempre que possível, os exemplos extraídos dessa referência foram adaptados para torná-los mais complexos, dada a robustez das ferramentas desenvolvidas. Posteriormente, foi criada a interface e inteligência da página web utilizando o Framework Django do Python. Dentre os algoritmos disponíveis no acervo que está sendo elaborado, destacam-se dois que podem ser utilizados para cálculos de reatores não isotérmicos: um que calcula os pontos de operação de um reator tanque contínuo ideal (CSTR), com reações múltiplas e considerando as variações dos calores específicos das espécies reacionais com a temperatura; e o segundo exemplo trata de um reator tubular ideal de fluxo empistonado (PFR), também com reações múltiplas e sistema de transferência de calor, em que a temperatura do fluido de troca térmica varia ao longo do reator. Em ambos os casos, os algoritmos geram gráficos que permitem ao usuário visualizar a influência de parâmetros relevantes para a reação e operação dos equipamentos, como temperatura e vazões molares das espécies reacionais em função do volume. Por fim, conclui-se que os códigos gerados são capazes de solucionar problemas complexos relativos ao projeto de reatores químicos, de alto esforço numérico, sendo distribuídos gratuitamente na internet, com possibilidade de o usuário definir os parâmetros reacionais, dispensando a instalação de softwares e o entendimento aprofundado de códigos de programação computacional, além de permitir avaliar diferentes condições de operação.

Palavras-Chave: simulação de processos, cálculo de reatores, python.
Instituição de Fomento: CNPq

Link do pitch:

https://www.youtube.com/watch?v=Xzubbj1FRKw&ab_channel=RAFAELSILVABARBOSA